Noise-contrastive estimation of normalising constants and GANs

Contents

1	Fon	actions génériques 2							
	1.1	Algorithme d'Hasting							
		MC MLE (Geyer)							
		Reverse logistic regression							
		NCE (Gutmann)							
		Graphiques							
2	App	Applications							
	2.1	Exemple basique : la loi normale							
		Modèle d'Ising							
3	Nouvelles approches 16								
	3.1	Bootstrap							
		Récursivité							
	3.3	Hasting iid							
	3.4	Reverse logistic regression : deux lois de même famille							
	3.5	Reverse logistic regression : deux lois de familles différentes							

1 Fonctions génériques

1.1 Algorithme d'Hasting

Utilité : simuler selon $p_m(., \psi)$ pour un paramètre ψ choisi.

Argument	Type	Exemple	Indication
X	vecteur	reauchy $(100, 0, 1)$	notre échantillon de densité inconnue p_m
n	entier	100	taille de la simulation
psi	vecteur	c(0,1)	paramètres choisis de la fonction p_m
h	fonction		fonction qui retourne $\overline{p_m}(.,\psi)$

Ci-dessous une autre version qui génère un échantillon iid.

Argument	Type	Exemple	Indication
X	vecteur	reauchy $(100, 0, 1)$	notre échantillon de densité inconnue p_m
n	entier	100	taille de la simulation
psi	vecteur	c(0,1)	paramètres choisis de la fonction p_m
h	fonction		fonction qui retourne $\overline{p_m}(.,\psi)$
ϵ	Entier	2	pas de décorrélation

```
return (filter[filter != 0])
}
```

1.2 MC MLE (Geyer)

Utilité: retourne une estimation des paramètres selon la méthode décrite dans le papier de Geyer.

```
mc_mle = function(x, n, psi, h){
    m = length(x)
    y = hasting(x, n, psi, h)
    L = function(theta){
        return(sum(log(h(x,theta)/h(x,psi))) - m*log(mean(h(y,theta)/h(y,psi))))
}

theta = optim(
    par = rep(1,length(psi)),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = L
)$par

return(theta)
}
```

1.3 Reverse logistic regression

La maximisation de la fonction objectif

$$l_n(\eta) = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n_j} log(p_j(X_{i,j}, \eta))$$

permet d'estimer les η qui sont fonction des constantes de normalisation des h_j . On utilise les notations suivantes :

$$\eta_j = -log(Z_j) + log(\frac{n_j}{n})$$
 avec Z_j la constante de normalisation de h_j

$$p_j(x) = \frac{h_j(x)e^{\eta_j}}{\sum_{k=1}^m h_k(x)e^{\eta_k}}$$

Première approche avec $m=2,\ n=n_1+n_2.$ On note $x=(X_{1,1},...,X_{n_1,1})$ l'échantillon de données de loi $\frac{h(,\alpha^*)}{Z_1(\alpha^*)}$, avec Z_1 que l'on cherche à estimer et α^* estimé par MCMLE. On note $y=(X_{1,2},...,X_{n_2,2})$ l'échantillon de données $\frac{h(,\psi)}{Z_2(\psi)}$ avec ψ que l'ont choisit. x est donné, on simule y avec une version iid de l'algorithme d'Hasting.

```
rev_log_reg = function(x, alpha, psi, n, h, eps){

m = length(x)
y = hasting_iid(x, n, psi, h, eps)

# calcul des probabilités p_j
denom = function(sample, eta) {
```

Argument	Type	Exemple	Indication
X	vecteur	reauchy(100, 0, 1)	notre échantillon de densité $p_m(.,\alpha^*)$
alpha	vecteur	c(0,1)	paramètres de la fonction p_m , estimés par MC MLE
psi	vecteur	c(0,1)	paramètres choisis de la fonction p_m
n	entier	100	taille de l'échantillon de densité $p_m(., \psi)$
h	fonction		fonction qui retourne $\overline{p_m}(.,.)$
ϵ	Entier	2	pas de décorrélation pour hasting iid

```
return(pm_barre(sample, alpha)*exp(eta[1]) + pm_barre(sample,psi)*exp(eta[2]))}
  p_1 = function(sample, eta){
    return (pm_barre(sample, alpha)*exp(eta[1]) / denom(sample, eta))}
  p_2 = function(sample, eta){
    return (pm_barre(sample, psi)*exp(eta[2]) / denom(sample, eta))}
  # fonction objectif
  L = function(eta) {
    return(sum(log(p_1(x, eta))) + sum(log(p_2(y, eta)))))
  # initialisation descente de gradient
  eta1 = -log(sd(x)*sqrt(2*pi)) + log(m/(m+n))
  eta2 = -\log(sd(y)*sqrt(2*pi)) + \log(n/(m+n))
  # optimisation
  const = optim(
    par = c(eta1, eta2),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = L
  )$par
 a = \exp(-\text{const}[1] + \log(m/(m+n)))
  return(a)
}
```

Seconde approche avec $m=2,\ n=n_1+n_2.$ On note $x=(X_{1,1},...,X_{n_1,1})$ l'échantillon de données de loi $\frac{h_1(,\alpha^*)}{Z_1(\alpha^*)}$, avec Z_1 que l'on cherche à estimer et α^* estimé par MCMLE. On note $y=(X_{1,2},...,X_{n_2,2})$ l'échantillon de données $h_2(,\psi)$ avec ψ que l'ont choisit et h_2 une loi usuelle dont on connait la constante de normalisation. x est donné, on simule y avec les méthodes usuelles.

Argument	Type	Exemple	Indication
X	vecteur	reauchy $(100, 0, 1)$	notre échantillon de densité $p_m(., \alpha^*)$
alpha	vecteur	c(0,1)	paramètres de la fonction p_m , estimés par MC MLE
psi	vecteur	c(0,1)	paramètres choisis d'une loi usuelle p_n
n	entier	100	taille de l'échantillon de densité p_n
h1	fonction		fonction qui retourne $\overline{p_m}(.,\alpha^*)$
h2	fonction		fonction qui retourne $p_n(.,\psi)$
law_y	fonction	rnorm	fonction qui retourne un échantillon suivant la loi p_n

```
rev_log_reg_with_noise = function(x, alpha, psi, n, h1, h2, law_y){
   y = do.call(law_y, c(list(n),psi))
   m = length(x)
```

```
# calcul des probabilités p_j
  denom = function(sample, eta) {
   return(h1(sample, alpha)*exp(eta[1]) + h2(sample,psi[1],psi[2])*exp(eta[2]))}
  p_1 = function(sample, eta){
   return (h1(sample, alpha)*exp(eta[1]) / denom(sample, eta))}
 p_2 = function(sample, eta){
    return (h2(sample, psi[1],psi[2])*exp(eta[2]) / denom(sample, eta))}
  # fonction objectif
  L = function(eta) {
   return(sum(log(p_1(x, eta))) + sum(log(p_2(y, eta)))))
  # initialisation descente de gradient
  eta1 = -\log(sd(x)*sqrt(2*pi)) + \log(m/(m+n))
  eta2 = -\log(sd(y)*sqrt(2*pi)) + \log(n/(m+n))
  # optimisation
  const = optim(
   par = c(eta1, eta2),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
   fn = L
  )$par
 b = \exp(-\text{const}[2] + \log(m/(m+n)))
 a = \exp(-\text{const}[1] + \log(m/(m+n)))
  # la constante de h_2 vaut normalement 1 si h_2 est une loi de densité, donc b est exactement le coef
  return(a/b*m/n)
}
```

1.4 NCE (Gutmann)

Utilité : Retourne l'estimation de la constante et des paramètres.

Argument	Type	Exemple	Indication
X	vecteur	reauchy $(100, 0, 1)$	notre échantillon de densité inconnue
law_y	fonction	rnorm	fonction qui retourne un échantillon suivant la loi p_n
n	entier	100	taille de l'échantillon de bruit suivant la loi p_n
params_y	vecteur	c(0,1)	arguments de la fonction law_y
log_pm	fonction		fonction qui retourne le logarithme de la densité p_m
log_pn	fonction		fonction qui retourne le logarithme de la densité p_n
size_theta	entier	3	taille de θ , vaut habituellement 2 ou 3

```
nce = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n){
    y = do.call(law_y, c(list(n),params_y))

m = length(x)

h = function(u, theta){
    return( 1 / (1 + n/m * exp(log_pn(u) - log_pm(u, theta))))
}
```

```
J = function(theta){
    return( sum(log(h(x, theta))) + sum(log(1 - h(y, theta))) )
}

theta = optim(
    par = rep(1, size_theta),
        gr = "CG",
        control = list(fnscale=-1),
        fn = J
)$par

return(c(theta[-size_theta], exp(-theta[size_theta])))
}
```

1.5 Graphiques

Utilité : afficher l'histogramme pour un échantillon de données x.

Utilité : pour NCE, afficher l'évolution des paramètres au fur et à mesure de l'augmentation de n (la dimension de l'échantillon de bruit)

```
NCE_evol_params = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, ratio, steps, labels) {
  # Creation de l'abscisse
 m = length(x)
 N = seq(0, m*ratio, length.out = steps + 1)
  # Creation de l'ordonnée
  theta = c()
  for (n in N) {
   theta = append(theta, nce(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n))
  # Formatage des données
  theta = t(rbind(matrix(theta, nrow = size_theta),N))
  df = as.data.frame(theta)
  df_melted = melt(df, id.vars = "N")
  # Plot
  plot_df = ggplot(df_melted, aes(x = N, y = value)) +
  geom_line(aes(color = variable, group = variable)) +
  geom_point(aes(color = variable, group = variable)) +
  labs(title = "Evolution des paramètres par rapport au bruit",
      x = "n (taille du bruit)",
```

Note : il faudrait optimiser le temps de calcul de ces fonctions, peut-être en matriciel au lieu des boucles ou bien avec du calcul en parralèle sur $\mathrm{CPU}/\mathrm{GPU}$

2 Applications

2.1 Exemple basique : la loi normale

Soit x l'échantillon de taille m obtenu selon la loi de densité inconnue p_d .

On considère ici que p_d appartient à la famille de fonctions paramétrées par $\theta = (c, \mu, \sigma)$ suivante :

$$p_m(u;\theta) = \frac{1}{Z(\mu,\sigma)} \times exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{u-\mu}{\sigma} \right)^2 \right] \quad \text{d'où} \quad ln(p_m(u;\theta)) = c - \frac{1}{2} \left(\frac{u}{\sigma} - \frac{\mu}{\sigma} \right)^2$$

```
pm_barre = function(u, theta){
    return(exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
}

log_pm = function(u,theta){
    return(theta[3] - 1/2 * (u/theta[2] - theta[1]/theta[2]) ** 2)
    # theta[1] = mu / theta[2] = sigma / theta[3] = c
}

log_pn_cauchy = function(u){
    return(log(dcauchy(u, mean(x), sd(x))))
}

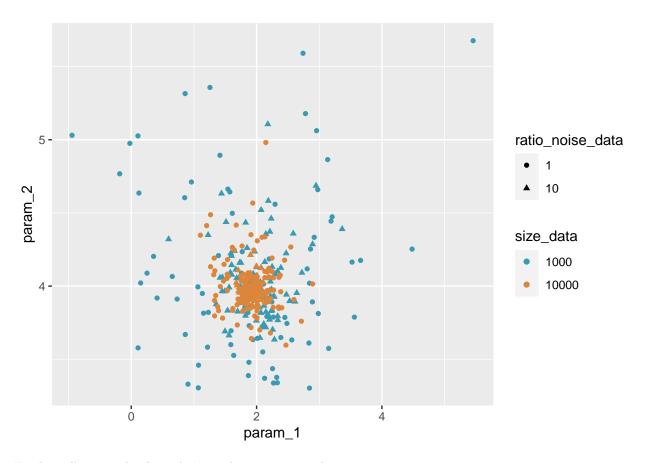
m = 10000
n = 10000
x = rnorm(m, 2, 4)
size_theta = 3

# METHODE MC MLE
mc_mle(x, n, c(mean(x),sd(x)), pm_barre)
```

[1] 2.454480 3.633104

Etudions l'impact de la dimension des échantillons sur la convergence des estimateurs.

```
ggplot(df_mcmle_filt, aes(x = param_1, y = param_2, color = size_data, shape = ratio_noise_data)) + geo
```

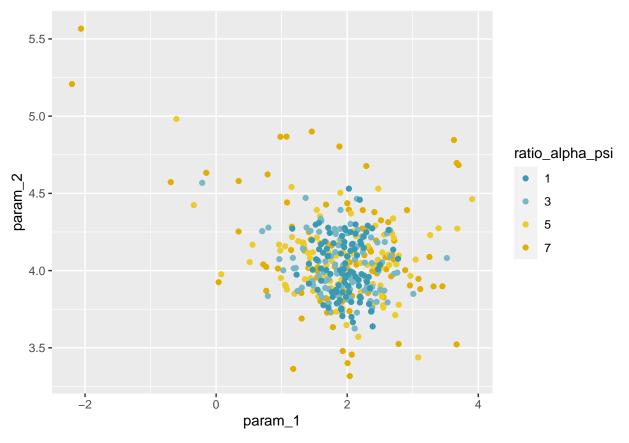


Etudions l'impact du choix de ψ sur la convergence des estimateurs.

```
df_mcmle_psi <- read_csv("df_mcmle_psi.csv")[,-1]

df_mcmle_psi = df_mcmle_psi[order(-df_mcmle_psi$ratio_alpha_psi),]

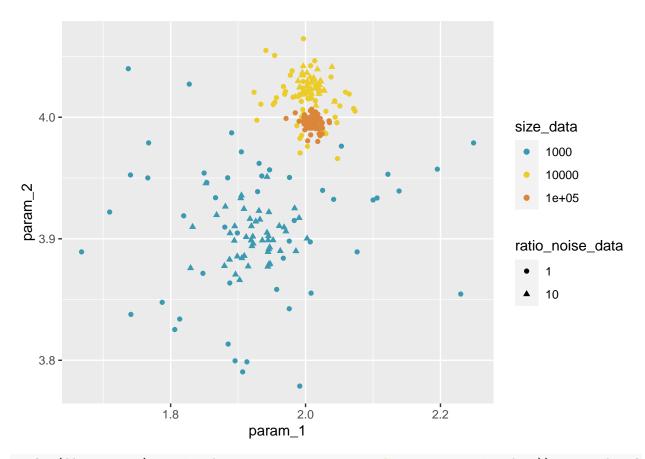
df_mcmle_psi$ratio_alpha_psi = as.factor(df_mcmle_psi$ratio_alpha_psi)
ggplot(df_mcmle_psi, aes(x = param_1, y = param_2, color = ratio_alpha_psi)) + geom_point() + scale_col</pre>
```



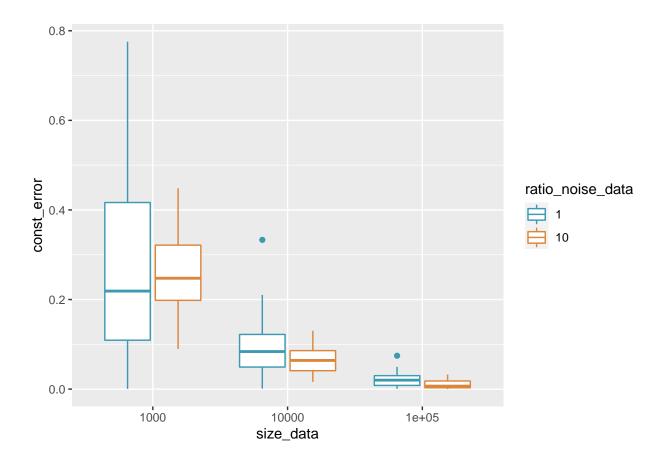
METHODE NCE nce(x, rcauchy, c(mean(x),sd(x)), log_pm, log_pn_cauchy, size_theta, n)

[1] 2.014970 3.964599 9.962068

 $ggplot(df_nce, aes(x = param_1, y = param_2, color = size_data, shape = ratio_noise_data)) + geom_point$

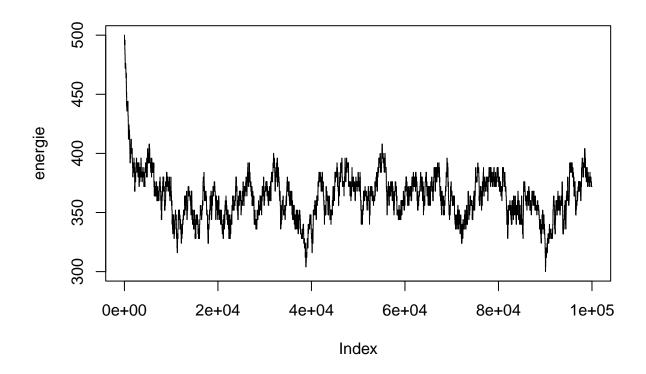


 ${\tt ggplot(df_nce,\ aes(x=size_data,\ y=const_error,\ color=ratio_noise_data))\ +\ geom_boxplot()\ +\ scale_lossedata))}$



2.2 Modèle d'Ising

```
# temps estimé 1min n=500, iter=100k
library('isingLenzMC')
       = 0.9
                          # paramètre de temperature
beta
       = 500
                          # nombre de sites
n
config = rep(1,n)
                          # generer une configuration à n sites
config1 = genConfig1D(n) # generer une configuration à n sites aléatoirement
energie = c()
iter = 100000
data = matrix(nrow= iter, ncol = n)
for (k in 1:iter){
  # on tire successivement des configurations jusqu'à obtenir convergence du niveau d'énergie
  #ce que l'on observera graphiquement
  config = isStep1D(beta, config, 1.0, 0.0, 1)$vec # tirage avec Metropolis
  data[k,] = config
  energie = c(energie,totalEnergy1D(config,1.0,0.0))
plot(energie, type ='l')
```



On définit la fonction coeur qui est à une constante de normalisation près la mesure de Gibbs associée à au modèle d'Ising de paramètre β . On définit la fonction ising1D(n) qui est rend toutes les configurations de spins possibles d'un modèle d'Ising unidimensionnel à n sites.

```
coeur = function(constante_normalisation,beta=0.9,config){
  # constante_normalisation : fonction de partition inconnue
  # beta
                            : paramètre de température
                            : une configuration de spins
  # config
  # Lorsque 'constante_normalisation' == vraie valeur de la fonction de partition pour le paramètre bet
          alors return la probabilité de la configuration de spins 'config'
  return ( exp(-beta*totalEnergy1D(config,1.0,0.0))/constante_normalisation )
}
ising1D = function(n){
  # n : nombre de sites pour une configuration
  # return l'ensemble des configuration 1D possibles dans une matrice
  # chaque ligne correspond à une configuration possible
  if (n==1)
    {
   return(matrix(c(1,-1),nrow=2))
```

Il se peut qu'il y ait conflit de notations pour cette sous section d'Ising avec les notations du précédent exemple. De plus, il y'a une erreur en sortie que je n'arrive pas résoudre pour l'instant. Mais je ne pense pas qu'elle soit très compliquée...

```
log_pn = function(u,param_pn){
  \# pn densite iid N(param\_pn[1], param\_pn[2]) de dim length(u)
  # Verifier que c'est bien ce qui est codé
       = length(u)
  log_d = 0
  for (k in 1:n){ log_d = log_d - 0.5 * ((u[k] - param_pn[1]) / param_pn[2]) ** 2 }
  return(-0.5*n*log(2*pi*(param_pn[2]**2)) + log_d)
log_pm = function(configuration, beta, theta){
  # theta = -log(Z)
  \# interraction entre sites = 1 et avec le champs extérieure = 0
  return ( -beta*totalEnergy1D(configuration,1,0) + theta )
nce_ising = function(matrix_ising,beta,log_pm,theta,law_pn,param_pn,log_pn,b_size){
  # matrix_ising = matrice ou en ligne sont rangées les observations d'Ising en 1D
  # beta
                 = paramètre de température de modèle d'Ising \in ]0,1[
                 = logarithme de la densité d'Ising
  # log_pm
  # theta
                 = paramètre à optimiser , en lien avec la constante de normalisation
  # law_pn = loi du bruit qui doit contenir dans son support {0,1}
  # param_pn = paramètres de la loi law_pn
  \# log_pn = log de la densité de pn
  # b_size = nombre d'observation du bruit, à ne pas confondre avec la taille d'une observation du bru
n = dim(matrix_ising)[2] # n = nombre de sites pour les observations d'Ising en 1D
```

```
= dim(matrix_ising)[1] # m = nombre d'observations d'Ising en 1D
  bruit = matrix(do.call(law_pn,c(list(b_size*n),param_pn)),ncol=n) # échantillon de vecteurs de bruit
  h = function(configuration, theta) {return(1 / (1 + b_size/m * exp(log_pn(configuration, param_pn) - log
  J = function(theta){
   # x vecteur de densite inconnue
    # y vecyeur de bruit
    objectif = 0
    for (k in 1:m){objectif = objectif + log(h(matrix_ising[k,],theta)) } # composante de l'objectif
    for (k in 1:b_size){objectif = objectif + log(1 - h(bruit[k,],theta)) } # composante de l'objectif
    return( objectif )
    }
  solution = optimize(f = J,
                      interval = c(-1e5, 1e5),
                      maximum = FALSE)
  return(exp(-solution))
            = 10
matrix_ising = ising1D(n)[100:900,]
beta
            = 0.9
            = 1
theta
law_pn
            = rnorm
            = c(0,1)
param_pn
            = 2**n
b_size
nce_ising(matrix_ising,beta,log_pm,theta,law_pn,param_pn,log_pn,b_size)
```

3 Nouvelles approches

3.1 Bootstrap

```
# Calcul de {size_boot} estimateurs par bootstrap
NCE_bootstrap = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n, size_boot, labels) {
  m = length(x)
  theta_bootstrap = c()
  x_bootstrap = x
  for (i in 1:size_boot) {
   theta_bootstrap = append(theta_bootstrap, nce(x_bootstrap,
                                                  law_y,
                                                  params_y,
                                                  log_pm,
                                                  log_pn,
                                                  size_theta,
   x_bootstrap = sample(x, size = m, replace=TRUE)
 return(matrix(theta_bootstrap, nrow = size_theta))
# Plot la moyenne empirique des estimateurs bootstrap en fonction du nombre d'estimateurs
NCE_bootstrap_plot = function(matrix_theta_bootstrap) {
  # Formatage des données pour plot
  array_boot = 1:length(matrix_theta_bootstrap[1,])
  df = as.data.frame(cbind(t(rowCumsums(matrix_theta_bootstrap))/array_boot,array_boot))
  df_melted = melt(df, id.vars = "array_boot")
  # Plot
  plot_df = ggplot(df_melted, aes(x = array_boot, y = value)) +
  geom_line(aes(color = variable, group = variable)) +
  labs(title = "Evolution des paramètres par bootstrap",
       x = "Taille du bootstrap",
       y = "Paramètres",
       color = "Légende") +
  scale_color_manual(labels = labels, values = c("blue", "red", "orange"))
 print(plot_df)
# etude bootstrap de l'estimateur
bootstrap = function(matrix, alpha){
 return(data.frame(
   theta = matrix_theta_bootstrap[,1],
   biais = rowMeans(matrix_theta_bootstrap) - matrix_theta_bootstrap[,1],
   IC = rowQuantiles(matrix_theta_bootstrap, probs = c(alpha/2, 1-alpha/2))
 ))
}
x_{test} = rnorm(1000, 2, 4)
matrix_theta_bootstrap = NCE_bootstrap(x_test, rcauchy, c(mean(x_test), sd(x_test)), log_pm, log_pn_cauchy
```

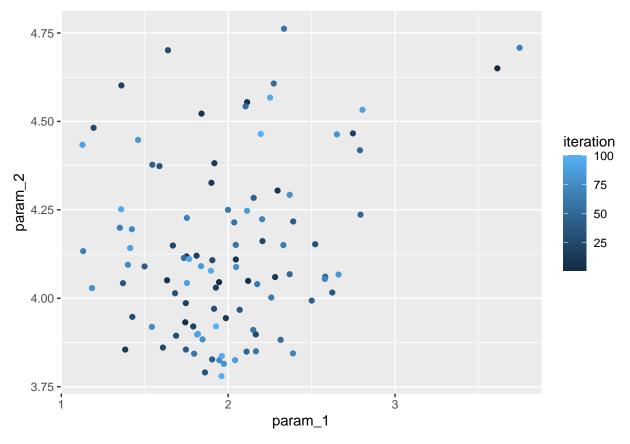
kable(bootstrap(matrix_theta_bootstrap, 0.05))

theta	biais	IC.2.5.	IC.97.5.
2.036242	0.0617818	1.873479	2.408742
3.978383	-0.0348073	3.820189	4.014394
10.070408	-0.2162332	9.303478	10.187756

3.2 Récursivité

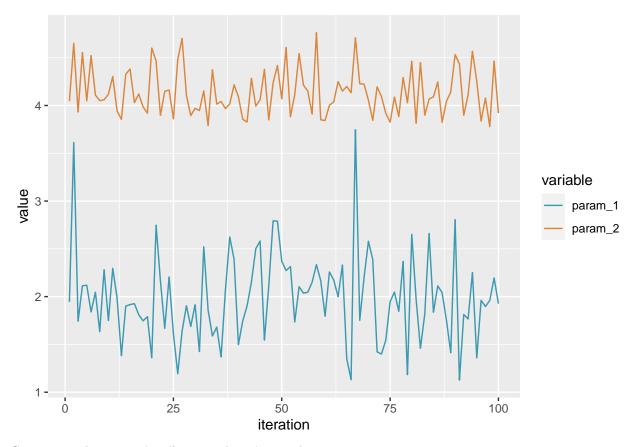
Utilité : améliorer récursivement la précision de l'estimation via les estimations précédentes

```
df_recurs_naif <- read_csv("df_recurs_naif.csv")[,-1]
ggplot(df_recurs_naif, aes(x = param_1, y = param_2, color = iteration)) + geom_point()</pre>
```



```
df_recurs_naif <- read_csv("df_recurs_naif.csv")[,-1]
colnames(df_recurs_naif) = c("iteration", "param_1", "param_2")

df_recurs_naif_melted = melt(df_recurs_naif, id.vars = "iteration")
ggplot(df_recurs_naif_melted, aes(x = iteration, y = value)) + geom_line(aes(color = variable, group = variable))</pre>
```



Cette approche naïve n'améliore pas la précision de notre estimation.

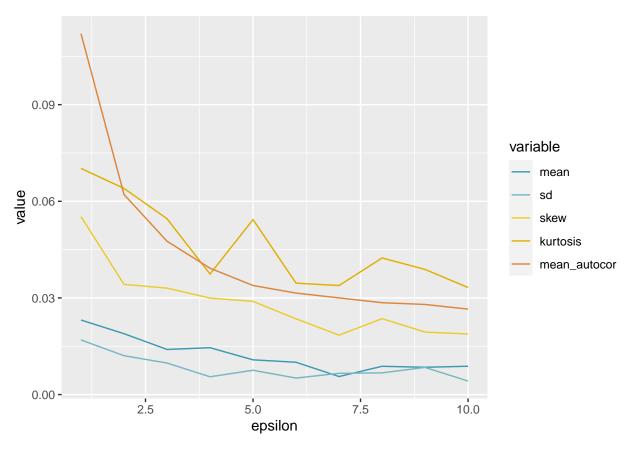
Nouvelle approche à venir.

3.3 Hasting iid

Afin de pouvoir appliquer numériquement la méthode de Reverse logistic regression, on aurait besoin de savoir simuler un échantillon iid suivant une loi dont on ne connait pas la constante de normalisation. L'idée est d'utiliser l'algorithme d'Hasting et de ne conserver qu'un échantillon tous les ϵ pas. Le code est en haut de ce document.

Etude de l'impact du choix du pas.

```
ggplot(df_hasting_iid_melted, aes(x = epsilon, y = value)) + geom_line(aes(color = variable, group =
```



 $\#ggplot(df_hasting_iid, aes(x = epsilon, y = time)) + geom_line()$

 $\epsilon=2$ semble être un bon choix au regard du gain en terme d'auto-corrélation et du temps de calcul.

3.4 Reverse logistic regression : deux lois de même famille

```
pm_barre = function(u, theta){
    return(exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
}

m = 1000
n = 10000
x = rnorm(m,2,4)
psi = c(mean(x), sd(x))

alpha = mc_mle(x, n, psi, pm_barre)
print(alpha)

## [1] 1.619072 4.009110
print(rev_log_reg(x, alpha, c(8,8), n, pm_barre, 2))

## [1] 9.18565
```

Etude de l'impact de la dimension, du ratio et des paramètres sur la convergence de la constante.

```
df_rev_log_reg_agg = aggregate(const ~ size_data + ratio_noise_data + ratio_alpha_psi,
                    data = df_rev_log_reg,
                    FUN = mean)
df_rev_log_reg_agg$ratio_alpha_psi = as.factor(df_rev_log_reg_agg$ratio_alpha_psi)
df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data = as.factor(df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data)
df_rev_log_reg_agg$size_data = as.numeric(df_rev_log_reg_agg$size_data)
df_rev_log_reg_agg$const_error = abs(df_rev_log_reg_agg$const - 4*sqrt(2*pi))
ggplot(df_rev_log_reg_agg, aes(x = size_data, y = const_error, color = ratio_alpha_psi, shape = ratio_n
   2.0 -
                                                                          ratio_alpha_psi
   1.5 -
const_error
                                                                               3
   1.0
                                                                           ratio_noise_data
                                                                               10
   0.5
                                                     12000
                                     8000
                    4000
                                  size_data
```

3.5 Reverse logistic regression : deux lois de familles différentes

```
pm_barre = function(u, theta){
    return(exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
}

m = 1000
n = 10000
x = rnorm(m,2,4)
psi = c(mean(x), sd(x))

alpha = mc_mle(x, n, psi, pm_barre)
print(alpha)
```

[1] 2.160142 3.978424

```
rev_log_reg_with_noise(x, c(2,4), c(mean(x),sd(x)), n, pm_barre, dcauchy, rcauchy)
## [1] 10.03752
df_rev_log_reg_noise <- read_csv("df_rev_log_reg_noise.csv")[,-1]</pre>
df_rev_log_reg_agg = aggregate(const ~ size_data + ratio_noise_data + law_noise,
                    data = df_rev_log_reg_noise,
                    FUN = mean)
df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data = as.factor(df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data)
df_rev_log_reg_agg$size_data = as.numeric(df_rev_log_reg_agg$size_data)
df_rev_log_reg_agg$const_error = abs(df_rev_log_reg_agg$const - 4*sqrt(2*pi))
ggplot(df_rev_log_reg_agg, aes(x = size_data, y = const_error, color = law_noise, shape = ratio_noise_d
    0.050 -
                                                                          ratio_noise_data
    0.025 -
                                                                          law_noise
                                                                             cauchy
    0.000 -
   -0.025 -
      999.950
                      999.975
                                     1000.000
                                                    1000.025
                                    size_data
```